

理学/X線回折装置RADシリーズ オプション サーチ/マッチアタッチメント

X線回折装置RADシリーズのオプションとして、小規模の標準データファイルと検索プログラムとから構成されるサーチ/マッチ・アタッチメントを開発致しました。

マイコンでは著しく困難であると思われていた検索を可能にしました。機能拡張基本ユニットのスムージング、ピークサーチの機能を有効に利用して、本格的な検索作業を実行するユニットであります。以下に構成、特長、手法等を簡単に紹介いたします。

1. 構成と検索手順

本ユニットを利用するのに必要な最小機器構成をFig. 1に示します。機器の利用状態と検索手順を説明します。

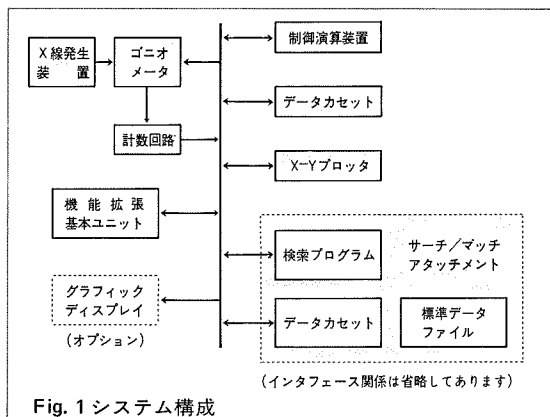


Fig. 1 システム構成

1. 回折計による測定生データはデータカセットに記録される。従って複数の試料を連続測定した後で、まとめて検索作業することが可能です。
2. 検索プログラム実行前に、指定された測定データのスムージング、ピークサーチが機能拡張基本ユニットで行なわれ、同時にバックグラウンドを除去した強度データが算出される。
3. 標準データと測定データのd値のズレの最大許容値、元素情報があればその情報等を入力して検索プログラムを実行する。
4. 標準データと測定データとのd値、相対ピーク強度の比較、演算を行ない、一致度の算定、順位付けを行なう。アルゴリズムは当社独自のアイデアを加えている。
5. 一致度の高い標準データのカード番号、化学式、一致度をプリンタに打ち出す。(一次検索)
6. 一次検索で選別された標準データのカード番号を入力すると、X-Yプロッタにバックグラウンドの除去された測定プロファイルと標準データの情報が重ね書きされる。これをみて答の正否を判定する。さらにグラフィックディスプレイ(オプション)を使用すれば、表示、消去が迅速となり、判定時間の短縮を期待できる。(二次検索)

二次検索の一例をFig. 3に示します。一次検索の一例はFig. 4に示します。

2. 特長

本ユニットの特長をまとめると下記となります。

1. RAD標準システムに、データカセット、X-Yプロッタ、機能拡張基本ユニット及び本ユニットを接続すれば、本格的な検索が可能となります。

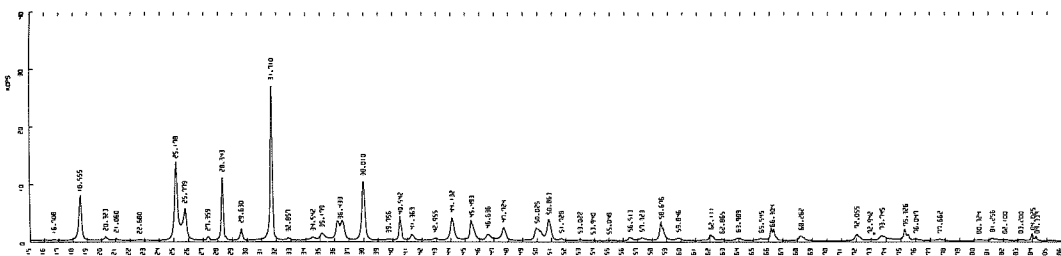


Fig. 2 ピークサーチのデータ

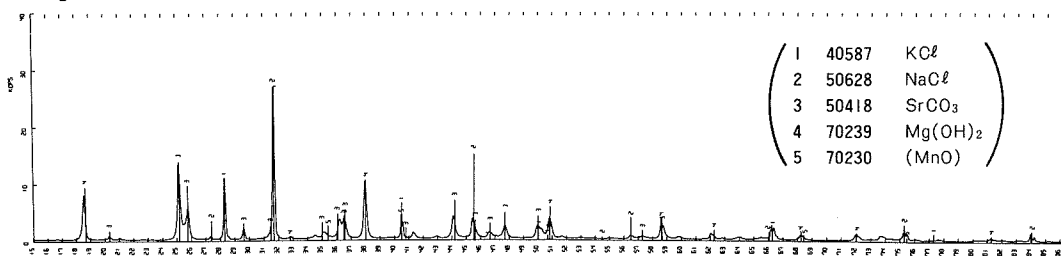


Fig. 3 二次検索の一例

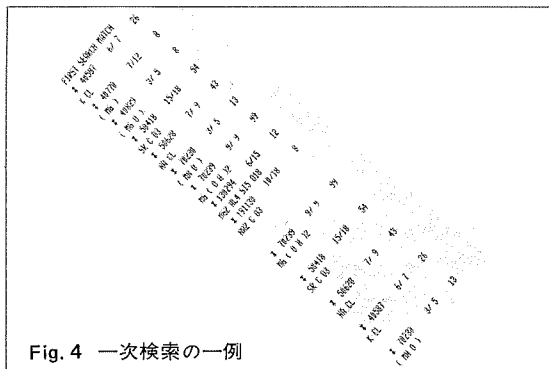


Fig. 4 一次検索の一例

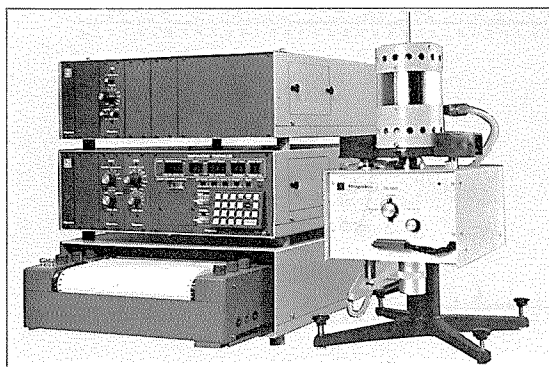
2. 検索プログラムによる成分物質候補の選別(一次検索)、測定プロファイルと標準データの図形比較による目視判断(二次検索)との併用で確実な検索が期待できます。
3. 一次検索で使用する強度データ及び二次検索の測定プロファイルはバックグラウンドを除去したデータで、大型、中型機に劣らぬ性能を有する。
4. 二台のデータカセット間でテープの複写を可能にしました。標準データファイルのバックアップテープ作成に利用できます。

標準データファイルはデータ数が多いほど望ましいが、ファイル媒体、容認される検索所要時間の制約を受けます。

提供できるファイルの標準構成は全分野から出現頻度の高い物質を選択したもので、データ数はおよそ1000パターンである。

研究室で、あるいは品質管理の一手段として行なわれる検索作業では、かならずしも莫大なファイルを対象としなくても良い利用目的も多いと伺っています。本ユニットの機能性は、このような領域で御満足のいただける役割を果たすと思います。

理学/急速加熱示差走査熱量天秤 (R・TG-DSC)



急速加熱示差走査熱量天秤(R・TG-DSC)は従来の抵抗炉付TG-DSCの電気炉を赤外炉に置きかえることにより、急速加熱、急速冷却のTG-DSC測定を可能にした装置です。この装置を使用すると、抵抗炉では困難であった試料を急速に加熱し、一定温度に於ける試料の重量変化、エネルギー変化を追跡する仕事が可能になります。したがって、樹脂の硬化反応の研究などに利用して有益になります。

また、急速に加熱することの他に急速に冷却することが可能であることから、急速冷却のTG-DSC測定ができると同時に一回の測定時間を非常に短くすることができ、仕事の効率化が計られます。

本装置は前述のように従来の抵抗炉付TG-DSCの電気炉部のみを赤外炉に置きかえたものですから、逆に赤外炉を抵抗炉に置きかえることが容易であり、目的により炉を使い分けることができます。

また、前報のR・TG-DTAをR・TG-DSCとして利用することも可能であり、その場合は、TG-DTA試料ホルダをTG-DSC試料ホルダと交換し、DSC回路、キャビネットを付加することで行なわれます。

1. 装置の構成図

本装置の構成図をFig.1に示します。これはすなわち、抵抗炉を備えたTG-DSCの炉体を赤外炉に置きかえたものです。

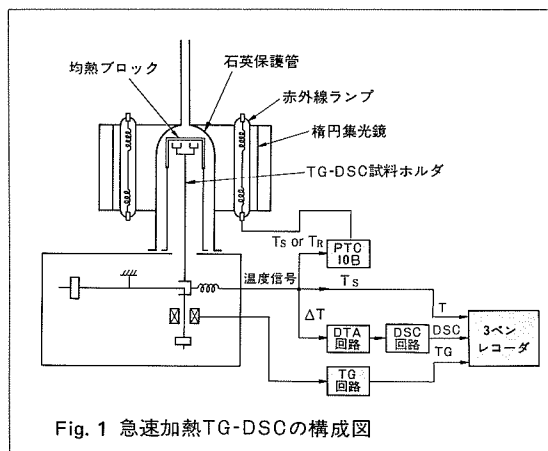


Fig. 1 急速加熱TG-DSCの構成図

2. 主な仕様

測定温度範囲	室温プラス α ～800°C ($\alpha \approx 20^\circ\text{C}$)
急速加熱速度	室温→800°C まで18秒以内
冷却速度	800°C→100°C まで9分以内
測温熱電対	プラチネル熱電対